

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ PD И PD-H МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Н.В. Чистякова

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Ю.И. Тюрин

Томский политехнический университет, Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050.

E-mail: chistyakovanv@tpu.ru

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF PD AND PD-H STRUCTURE

N.V. Chistyakova

Scientific adviser: professor, Ph.D. Yu. I. Tyurin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin av., 30, 634050

E-mail: chistyakovanv@tpu.ru

Annotation. *In this paper a popular simulation method - the molecular dynamics are consider. The important substances - Pd and Pd-H structures were obtained. The different ways of constructing of interatomic potential are discusses. These are pair potential, embedded atom potential and the first-principles calculations.*

В настоящее время, компьютерное моделирование, наряду с экспериментом, стало важным инструментом в научном исследовании. В связи с развитием информационных технологий развиваются и методы моделирования. Современные компьютеры позволяют рассчитать процессы с участием миллионов частиц. А также визуализировать структуру материалов с мельчайшими подробностями. Существует множество различных методик для моделирования самых разных процессов. Из них можно выделить три основных метода: метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики, феноменологический подход.

Метод молекулярной динамики (ММД) является, пожалуй, самым популярным среди исследователей. Его основа - описание процесса, с помощью основного уравнения динамики - второго закона Ньютона, позволяет естественным образом описать эволюцию системы частиц.

В настоящей работе для моделирования выбран палладий и его соединения с водородом. Палладий обладает простой для моделирования структурой и является перспективным материалом для водородной энергетики. Несмотря на большое количество работ по исследованию систем палладий - водород, в том числе и ММД моделей, нерешенных вопросов остается много.

Существует ряд мощных программных пакетов для моделирования ММД. В данной работе используется программа XMD, разработанная Джоном Рифкиным в университете Коннектикута, США [1]. Программа управляется посредством командного файла.

Кристаллическая решетка палладия - кубическая гранецентрированная. Построить решетку можно непосредственно с помощью команд XMD. Нужно установить размеры расчетной ячейки - для этого задается целое число - n, размер расчетной ячейки получается умножением числа n на параметр решетки. Фактически n определяет число элементарных ячеек из которых состоит расчетная ячейка. Для корректного расчета, важно, чтобы размеры расчетной ячейки превышали радиус обрезания потенциала минимум в два раза. Далее необходимо задать число, тип и положение атомов в элементарной ячейке.

Параметр решетки и массы атомов, входящих в состав элементарной ячейки задаются далее в командном файле.

Следующий шаг - задание потенциала межатомного взаимодействия. Построение такого потенциала это отдельная сложная задача. Существует несколько подходов к решению этой задачи. Одними из первых появились парные потенциалы - несложные эмпирические формулы, определяющие энергию взаимодействия любой пары атомов в решетке, в зависимости от расстояния между ними. Это, например, широко известные потенциалы Леннарда-Джонса и потенциал Морзе (1). Параметры таких потенциалов подбираются из сравнения с экспериментальными данными.

$$U(r) = D\beta e^{-\alpha(r-r_0)} (\beta e^{-\alpha(r-r_0)} - 2) \quad (1)$$

Более сложные потенциалы - многочастичные. В них учитываются взаимодействия всех атомов решетки между собой. Один из наиболее распространенных методик расчета подобного потенциала - метод погруженного атома (англ.: embedded atom method - EAM). В этом методе полная энергия системы, приходящаяся на атом кристалла определяется по формуле (2).

$$E = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_i \phi(r_i) \quad (2)$$

Еще более сложный способ определения потенциала, так называемые, расчеты из первых принципов. В этом методе учитывается электронная структура каждого атома. Несомненным преимуществом здесь является то, что потенциал получается естественным образом, при математическом описании материи на самом глубоком уровне без применения искусственных приемов подгонки параметров. К сожалению, подобные расчеты очень сложны, поэтому рассчитанные параметры часто не совпадают с экспериментальными данными. Кроме того, из-за большого количества компьютерного времени, затрачиваемого на расчеты, возможно рассчитать только системы, состоящие из небольшого числа атомов (порядка нескольких сотен).

В настоящей работе используется потенциал Морзе и EAM потенциал, полученный в работе [2].

В программе важно правильно выбрать граничные условия, в соответствии с условиями протекания процесса. В данной работе выбраны периодические граничные условия. Это позволяет рассмотреть поведение атомов кристалла в объеме.

Важным моментом в любой ММД программе является релаксация кристаллической решетки - помещение всех атомов решетки в положения с минимумом потенциальной энергии, т.е. фактически определение равновесных положений атомов в решетке. Это позволит исключить влияние смещений от положений равновесия, возникающих в результате тепловых колебаний, на расчет параметров.

Кристаллическая решетка Pd, построенная в работе представлена на рисунке 1.

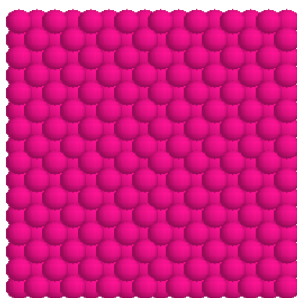


Рис. 1. ГЦК решетка палладия

Важной задачей является изучение взаимодействия водорода с палладием. Палладий способен накапливать водород в больших количествах, а также высвобождать его практически без изменения структуры собственной кристаллической решетки.

Известно, что водород находится в палладии в междоузлиях. Причем существует два типа междоузлий - октопоры и тетрапоры. Водород занимает преимущественно последнее.

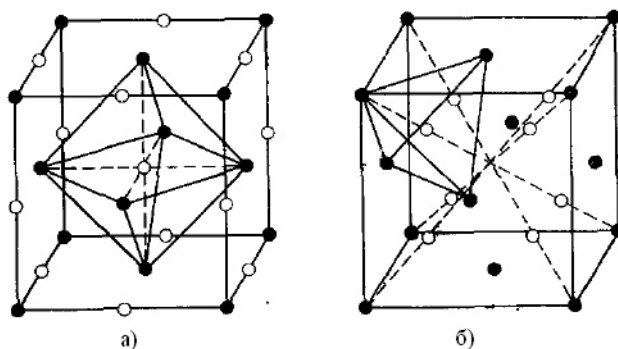


Рис. 2. Типы междоузлий в решетке палладия - октаэдрические (а) и тетраэдрические (б) пустоты

В качестве потенциала взаимодействия для всех типов пар атомов (H-H, Pd-Pd, Pd-H) выбран потенциал Морзе с параметрами, представленными в таблице 1.

Таблица 1

Параметры для расчета

	α [\AA^{-1}]	β	$D, 10^{-19}, \text{Дж}$
H-H	1,3	6,5	0,072
Pd-Pd	2	1	0,754
Pd-H	0,9	9,76	0,171

Кристаллическая решетка Pd-H, построенная в работе представлена на рисунке 3:

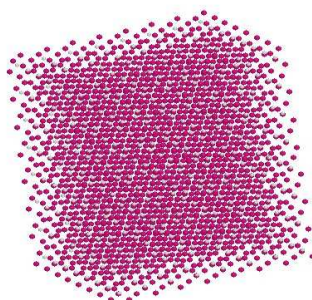


Рис. 3. Решетка PdH, содержание H - 75%

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Программа XMD [Электронный ресурс].- режим доступа: xmd.sourceforge.net
2. Sheng H.W, Kramer M. J., Cadien A., Fujita T. and Chen M.W. , Highly optimized embedded - atom-method potentials for fourteen fcc metals. Phys. Rev. B.-2011.- 83.- P. 134118